

Релаксация фотопроводимости границы раздела полимер/полимер после УФ облучения

Булатова Эльвира Ришатовна

Фаттахова Валерия Олеговна

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Юсупов Азам Равилевич, к.ф.-м.н.

elya.bulatova@mail.ru

В работе [1] было показано, что на границе раздела двух полимерных диэлектриков формируется высокопроводящая область. Установлено, что подвижность и электропроводность вдоль границы раздела существенно превышают объемные значения. Дальнейшие исследования границы раздела показали, что облучение образца ультрафиолетовым светом приводит к росту тока. Механизм роста фототока может быть связан с изменением дипольного момента, который также определяет наблюдаемое в работе [2] длительное послесвечение в тонких пленках полидифениленфталида. Следует также отметить, что аналогичный эффект, роста фототока наблюдается на структурах с полиметилметакрилатом (ПММА). Как было показано в работе [3], облучение ПММА используемого в качестве подзатворного диэлектрика в структуре полевого транзистора приводит к существенному улучшению характеристик транзистора за счет изменения дипольного момента вызванного изменением функциональных групп ПММА с $-\text{CH}_3$ на $-\text{COOH}$ [3], что в свою очередь приводит к изменению заряженных состояний вблизи поверхности полимера. Особенностью фотопроводимости границ раздела таких структур является наличие длительной релаксации фотопроводимости. Таким образом, целью настоящей работы является изучение релаксации фотопроводимости в структуре с границей раздела полимер/полимер.

В настоящей работе были изготовлены экспериментальные структуры в следующей последовательности:

1. На предварительно очищенную стеклянную пластинку методом центрифугирования носилась полимерная пленка (из раствора полимера в циклогексаноне) толщиной $\sim 0,5$ мкм. 2. После удаления остатков растворителя путем отжига при температуре 150°C (температура кипения циклогексанона) в течение 40 минут, наносились металлические электроды методом вакуумного термодиффузионного напыления, через теньевую маску. В качестве материалов электродов использовалась медь. 3. Последним этапом было нанесение второго (верхнего) слоя полимера методом центрифугирования с повторным отжигом образца. Облучение полученных структур проводили лазером с длиной волны $\lambda = 405$ нм и мощностью (0,050 мВт).

На (рис. 1) представлены вольтамперные характеристики (ВАХ) экспериментальных структур при темновом измерении и фотооблучении. Как можно видеть из рисунка, фотооблучение приводит к росту тока в ~ 2 раза. Исследование временных зависимостей фототока показало, что рост тока происходит не мгновенно, а с некоторой задержкой составляющей 5-10 с. В дальнейшем было установлено, что процесс релаксации фототока носит длительный характер.

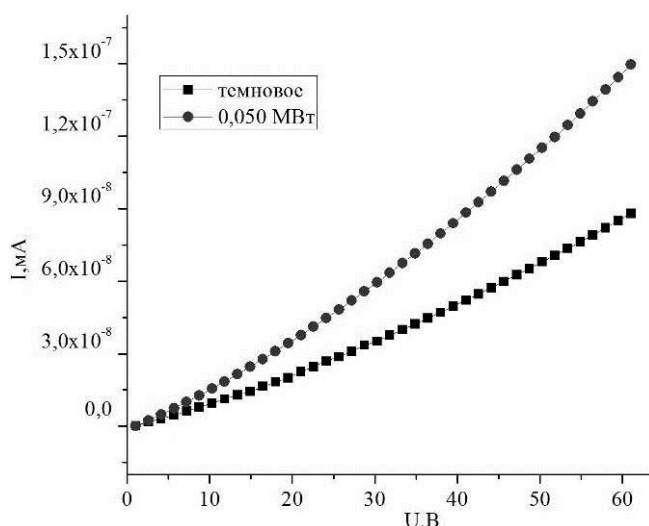


рис. 1 ВАХ экспериментальной структуры при темновом измерении и фотооблучении.

На (рис. 2) представлены результаты измерения релаксации фототока после отключения освещения. По данным зависимостям были проведены оценки времени релаксации, которое составляло от 5 до 30 минут.

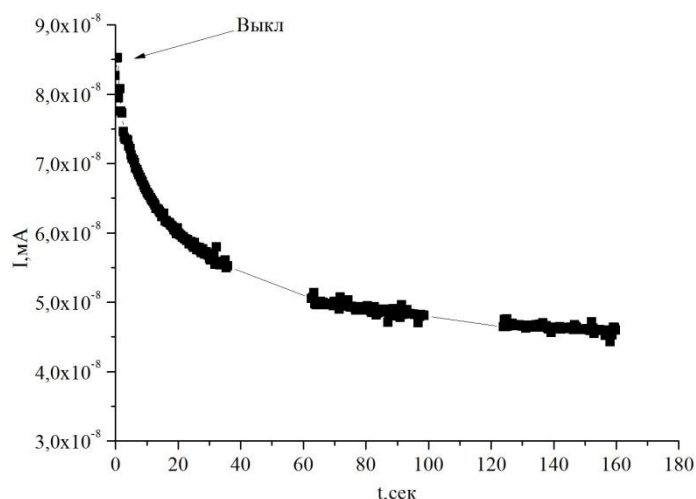


рис.2 Кривая релаксации фототока измеренная на экспериментальной структуре после отключения источника освещения.

В докладе приводятся результаты экспериментальных измерений, а также интерпретация полученных результатов.

Список публикаций:

- [1] Р.М. Гадиев, А. Н. Лачинов, В. М. Корнилов, Р.Б. Салихов, Р.Г. Рахмеев, А.Р. Юсупов. Письма в ЖЭТФ 90, 821 (2009).
- [2] В.А. Антипин, А.Н. Лачинов, Д.А. Мамыкин, А.А. Ковалёв, С.С. Остахов, В.В. Шапошникова, С.Н. Салазкин, В.П. Казаков, Химия высоких энергий. 44, 4, 345 (2010)
- [3] H.-W. Zanz, K.-H.Yen *Electrochemical and Solid-State Letters*. 11,8, 222 (2008).

Первопринципное исследование структуры кристаллогидратов

Бызова Елена Сергеевна

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

L6930@mail.ru

Кристаллогидраты считаются довольно распространенными веществами в нашей жизни. Их применение обширно: протравливание семян, крашение древесины, в качестве вяжущего и антисептического средства, дезинфекция, производство антиперспирантов и прочее. Изучение этого класса соединений началось еще в XIX веке, сейчас же ученые серьезно продвинулись вперед. Это касается как поиска новых способов их применения, так и методов борьбы с вредным гидратообразованием, мешающим процессам на производстве [1-3]. Разумеется, существует два подхода к проведению исследований: теоретические расчеты и эксперименты. Методы компьютерного моделирования привлекают тем, что дают возможность прогнозировать свойства ранее неизвестных структур или же недостаточно изученных, причем точность сопоставима с экспериментальными результатами.

Таким образом, в данной работе был проведен первопринципный расчет структуры моногидрокарбоната ($\text{CaCO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$). Не смотря на то, что этот объект в настоящее время вполне неплохо изучен, для нашей цели он подходит отлично: для будущих расчетов различных кристаллогидратов необходимо отладить методику вычислений. Исследование проводилось при помощи нового (относительно прошлой версии, в которой мы работали ранее [5]) программного пакета CRYSTAL17 [6]. В нем метод Хартри-Фока совместно с теорией функционала плотности DFT позволяет выполнять квантовохимические вычисления с хорошей точностью.

Для выбора оптимальной методики расчета параметров кристаллогидратов было решено провести ряд вычислений подобно тому, как ранее было сделано при исследовании льда [7]. Среди функционалов были взяты pbe, pbe-d3, b3lyp, b3lyp-d3. Суффикс d3 является новым для программы CRYSTAL17, он позволяет учесть дисперсионное взаимодействие. В качестве базиса были использованы встроенные в программу минимальные базисы Попла STO-3G, STO-6G, а также совокупность Ca_86-511d3G_catti_1991, C_6-31d1G_gatti_1994, O_6-31d1_gatti_1994 и H_3-1p1G_gatti_1994 (в таблице обозначена ***) из специальной библиотеки, разработанной для подобных расчетов [8]. Результаты представлены в таблице: